

Projekt NCN Harmonia 8 nr 2016/22/M/ST1/00257
Nowoczesne Metodologie numeryczne w mechanice kwantowej

- Kierownik projektu: dr hab. Karolina Kropielnicka
- Okres realizacji: 25.IV.2017-24.IV.2021
- Kwota dofinansowania: 140 400,00 PLN

Projekt poświęcony jest analizie numerycznej równań różniczkowych w mechanice kwantowej. W szczególności, uwaga nasza jest skupiona na równaniach w ujęciu semiklasycznym, gdzie bardzo mały parametr ϵ (stała Plancka podzielona przez dwukrotność masy obserwowanej cząsteczki), powoduje ekstremalnie wysokie oscylacje rozwiązania, a zatem istotne trudności w analizie numerycznej. Celem projektu jest rozwijanie teorii numerycznej aproksymacji dla równań w mechanice kwantowej oraz wykorzystanie tych wyników do badań w teorii sterowania optymalnego. Projekt podzielony jest na dwa pakiety:

1. Równania mechaniki kwantowej. Nieliniowe równanie Schroedingera, Kleina–Gordona, Wignera, Pauliego i Diraca są w centrum naszych zainteresowań. Poszukujemy odpowiednich metod o wysokim rzędzie zbieżności i możliwie niskiej złożoności obliczeniowej. Przedstawiamy *analizę wydajności i kosztów* opracowanych metod, oraz porównujemy je z innymi, powszechnie używanymi metodami.

2. Teoria sterowania optymalnego w mechanice kwantowej. Nasze rozważania rozpoczynamy od układów mechaniki kwantowej modelowanych przez równanie Schroedingera. Opracowawszy metodologie dla innych równań z pierwszego pakietu przejdziemy do zagadnienia sterowania układów modelowanych przez te właśnie równania (Kleina–Gordona, Wignera, Pauliego itd).

Zagadnienia mechaniki kwantowej motywowane są pytaniami stawianymi w fizyce i chemii teoretycznej, a możliwość sterowania stanami atomów i cząstek za pomocą wiązki lasera zdecydowanie otwiera nowe perspektywy technologiczne. Rzadko kiedy równania te można rozwiązać analitycznie, dlatego uciekamy się do aproksymacji numerycznej rozwiązań, która jest niesłychanie trudnym zadaniem w obliczu ekstremalnie wysokich oscylacji i dość skromnych mocy obliczeniowych. Zaproponowana przez Richarda Feynmana w 1982 roku wizja komputerów kwantowych stosowanych do obliczeń w mechanice kwantowej, jako alternatywa dla klasycznych komputerów, jest rewolucyjnym pomysłem. Jednakże w rozwoju technologii komputerów kwantowych nie można uciec przed wykorzystaniem klasycznych komputerów, a zatem wysoko wydajnych metod numerycznych.

Problemy numeryczne w mechanice kwantowej są zatem nie tylko niebagatelne ale i potrzebne; z tego powodu rozwój tej dziedziny jest dynamiczny i przyciąga czołowych naukowców z zakresu fizyki, chemii i matematyki. W świetle wysokiej wydajności naszej metodologii pragniemy wyprowadzić podobne algorytmy dla innych równań mechaniki kwantowej oraz wdrożyć je do zastosowań w teorii optymalnego sterowania.

Projekt realizowany będzie we współpracy z Arielem Iserlesem (University of Cambridge, UK), rozpoznawalnym i cenionym w świecie ekspertem w zakresie nowoczesnej analizy numerycznej, jednym z liderów o imponującym zakresie wiedzy. Jesteśmy przekonani, że aktywność Ariele Iserlesa w polskim środowisku będzie owocna również dla polskiej nauki. Mamy nadzieję, że współpraca ta pomoże nawiązać polskim naukowcom nowe kontakty naukowe; zarówno ogólnopolskie jak i międzynarodowe.